

**Дмитро Кардашев<sup>1</sup>, Костянтин Кардашев<sup>2</sup>**  
<sup>1</sup>Одеська національна морська академія,  
<sup>2</sup>Одеська національна академія зв'язку ім. О.С. Попова,  
м. Одеса, Україна

## ЛОКАЛЬНА ГУСТИНА ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ ГРАФЕНУ

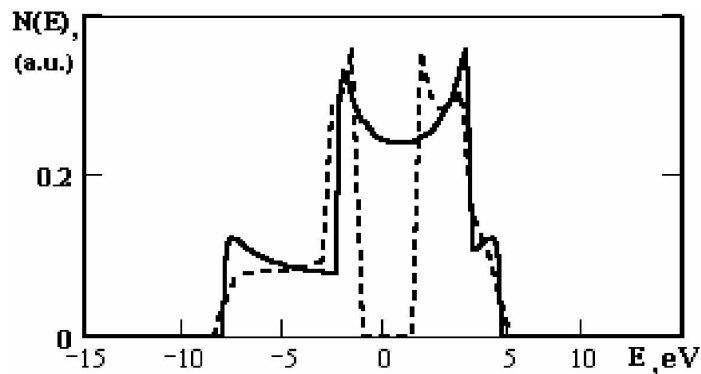
Графен є двовимірним кристалом, який складається з одиночного шару атомів вуглецю, зібраних в гексагональну ґратку, та є перспективним матеріалом для потреб сучасної електроніки.

Електронна енергетична структура матеріалу знаходить віддзеркалення у багатьох його фізичних властивостях. Зонна структура графену розрахована в роботі [1] у наближенні сильно зв'язаних електронів.

Для визначення локальної густини електронних станів в гексагональному моношарі ми скористалися методом функцій Гріна з напівемпіричним одноелектронним гамільтоніаном сильного зв'язку, заданим в базисі однієї  $s$ - та двох  $px$ ,  $py$ -атомних орбіталей. Структура графену моделювалася ґраткою Бете, яка зберігає гексагональне розташування сусідніх атомів.

Функцію Гріна для  $i$ -го вузла можна обчислити, використовуючи рівняння Дайсона (підсумовування проводиться по найближчих сусідах)

$$(EI_{ii} - H_{ii})G_{ij} = I_{ij} + \sum_{k=1}^3 H_{ik}G_{kj}.$$



На рисунку наведені розраховані аналітично локальні густини електронних станів (уявні частини функцій Гріна) гексагонального моношару (суцільна лінія) та тетраедрично-координованої структури [2] (пунктир). Можна бачити, що енергетичний спектр гексагональної структури, у відмінності від алмазоподібної, не має забороненої зони, тобто графен має провідність металевого типу.

1. K.S. Novoselov *et al*, Science **306**, 666 (2004).
2. Д.Л. Кардашев, Фізика і хімія твердого тіла **4**, 643 (2001).